29.DNA Supercoilのtopologyと弾性モデル(パターン形成,運動と統計,研究会報告)

AUTHOR(S):
鶴, 秀生; 和達, 三樹

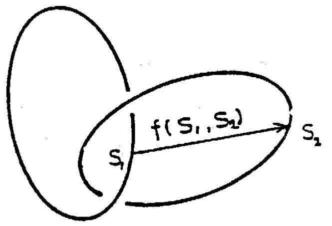
29. DNA Supercoilのtopologyと弾性モデル

東大・教養　鶴　秀生，和達　三樹

環状の２重らせんDNAは，２本のヌクレオチド鎖の環どうしの linking number，L_Kで分類できる。L_Kは次のような積分で表わすことができる。

$$L_K = \frac{1}{4\pi}\int ds_1 \int ds_2 \frac{1}{|f|^3} \det\left(\frac{\partial f}{\partial s_1}, \frac{\partial f}{\partial s_2}, f\right)$$

ただしfは右図のようなベクトル関数である。またlinking numberはtopological numberなのでDNAの連続変形に対して不変であることがわかる。



writhing number W_r，twisting number T_wという２つの数もDNAの形を特徴づける数として定義できる。またこの２つの数は linking number と次のような式で関係づけられる。

$$L_K = W_r + T_w$$

ここでW_r，T_wは連続的に変化する数であることを注意したい。

次にlinking numberを与えた時のDNAの安定な形を考えるために弾性体モデルを導入し，弾性エネルギーの極小を捜すことにする。DNAを弾性体の断面が円形の棒であるとすると，弾性エネルギーUは

$$U = \int_0^L \frac{A}{2}(\theta'^2 + \sin^2\theta\,\varphi'^2) + \frac{C}{2}(\psi' - \alpha_0)^2 ds$$

で表わせる。ここでθ，φはDNA中心軸の方向ベクトルの極角，ψはヌクレオチド鎖の中心軸まわりの角，α_0はそのもともとのねじれ率，A, Cは曲げとねじりの弾性定数である。閉じる条件

$$\int_0^L (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)\,ds = 0 \tag{A}$$

の下でUの条件付変分をとると次のような連立非線形微分方程式が得られる。

$$A(\sin\theta\cos\theta\,\varphi'^2 - \theta'') - \lambda\cos\theta\cos\varphi + \mu\sin\theta = 0 \qquad (\mathrm{B}\cdot 1)$$

$$A(\sin\theta\,\varphi'' + 2\cos\theta\,\varphi'\theta') + \lambda\sin\varphi = 0 \qquad (\mathrm{B}\cdot 2)$$

$$C\psi'' = 0 \qquad (\mathrm{B}\cdot 3)$$

(B・3)よりただちに$\psi=\alpha s$が得られる。条件(A)を考え$\theta'=0$の場合の解を考えると(B・1),(B・2)の方程式は

$$\begin{cases} \mu=0, & \theta=\dfrac{\pi}{2} \\ A\varphi''+\lambda\sin\varphi=0 \end{cases} \tag{C}$$

のようになり条件(A)を満たし，なめらかに閉じる解は

$$\varphi(s)=\frac{2\pi nS'}{L} \qquad n=\pm 1,\ \pm 2,\cdots\cdots \tag{D・1}$$

$$\sin\frac{\varphi(s)}{2}=k\,\mathrm{sn}(\omega_n s,\ k) \tag{D・2}$$

$$\omega_n=\frac{4n}{L}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta}},\quad k=0.9089 \qquad n=\pm 1,\ \pm 2,\cdots\cdots$$

(D・1),(D・2)に対する曲げの弾性エネルギーU_{b}^{i}は

$$U_{\mathrm{b}}^{1}=\frac{2\pi^2An^2}{L} \tag{E・1}$$

$$U_{\mathrm{b}}^{2}=\frac{16(2k^2-1)K^2(k)An^2}{L} \tag{E・2}$$

で表わすことができる。DNAの鎖は同じ点を占めることができないのでθが$\frac{\pi}{2}$からわずかにずれることを許すと(E・1),(E・2)はwrithing number W_{r}を使って次のように表わすことができる。

$$U_{\mathrm{b}}^{1}=\frac{M_1A}{L}(|W_{\mathrm{r}}|^2+1) \qquad W_{\mathrm{r}}=0,\ \pm 1,\cdots\cdots \tag{F・1}$$

$$U_{\mathrm{b}}^{2}=\frac{M_2A}{L}(|W_{\mathrm{r}}|^2+1) \qquad W_{\mathrm{r}}=\pm 1,\ \pm 3,\cdots\cdots \tag{F・2}$$

ただし$M_1\approx 19.739$, $M_2\approx 14.055$なのでwriting number W_{r}が同じときには,(D・2)に対応する8の字型のほうが弾性エネルギーが小さいことがわかる。ねじりの弾性エネルギーU_{t}はW_{r}によって次のように表わすことができる。

$$U_{\mathrm{t}}=\frac{2\pi^2C}{L}(\Delta L_{\mathrm{K}}-W_{\mathrm{r}})^2 \tag{G}$$

ここで$\Delta L_{\mathrm{K}}=L_{\mathrm{K}}-\dfrac{L\alpha_0}{2\pi}$である。$|\Delta L_{\mathrm{K}}|$が増すとねじりの弾性エネルギーが大きくなる。よ

って$|\Delta L_K|$が増すと全弾性エネルギーを減らすために(D・1)の$n=1$, $W_r=0$の円から(D・2)の$n=\pm 1$, $W_r=\pm 1$の8の字形にDNAが変化することがわかる。より一般に$|\Delta L_K|$が増すとともにより複雑な形(Supercoil)を取ることが予想される。このように簡単なモデルではあるが，Supercoil間の転移を説明できる。

文　　献

1)　M. Wadati and H. Tsuru, Physica D. (to appear).

2)　H. Tsuru, Master Thesis.

30.　DNAの超らせん

── 高分子物理におけるトポロジーの一例題 ──

農工大・教養　田　中　文　彦

現在知られている環状DNAの多くは，その生活史のひとつ以上の段階で超らせん(supercoil)構造をとる。超らせんは二重鎖の互いの絡まり合いによるトポロジー的な制限によって生じる高次構造で，その力学的，統計的性質は生体物質の機能と関連するので興味が持たれている。ここではDNAを曲げとねじれの2つの弾性定数A, Cで特徴づけられる連続的弾性棒モデル(半屈曲性高分子)で記述する。閉環状二重らせんの場合，絡み数Lk(トポロジー不変量)と全ツイスト数Twの差はライジング数(writhing number)Wrと呼ばれ，変形の間Lkが一定に保たれる制限があるため複雑に曲がりくねった高次構造が安定になる。

§1．空間曲線のライジング数

経路長sで表示した，滑らかで交点を持たない全長Lの閉じた空間曲線$\boldsymbol{r}(s)$を考える。曲線上の各点に，この曲線に垂直に単位ベクトル$\boldsymbol{u}(s)$をくっつけて$\{\boldsymbol{r}(s),\ \boldsymbol{u}(s)\}$のセットを“帯(おび)”と呼ぶ。$\boldsymbol{u}(s)$も滑らかに変化するものとする。この帯の各点には，曲線の接線ベクトル$\boldsymbol{t}$と$\boldsymbol{v}\equiv\boldsymbol{t}\times\boldsymbol{u}$で定義される単位ベクトル$\boldsymbol{v}$で動座標系$\{\boldsymbol{t},\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\}$を構成することができる。曲線に沿って進むと，この座標系は回転するが，この回転を特徴づける回転ベクトルを$\boldsymbol{\Omega}=\omega_1\boldsymbol{t}+\omega_2\boldsymbol{u}$